

## ОБРАЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРОН-ТРАНСПОРТНОГО БЕЛОК-БЕЛКОВОГО КОМПЛЕКСА ФЕРРЕДОКСИНА И ФЕРРЕДОКСИН-НАДФ+ РЕДУКТАЗЫ ИЗ *ZEА MAYS* И ГИДРОГЕНАЗЫ ИЗ *CHLAMYDOMONAS REINHARDTII*

Федоров В.А., Хрущев С.С., Коваленко И.Б., Абатурова А.М., Ризниченко Г.Ю.,  
Рубин А.Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т,  
кафедра биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12, +7(495)9390289,  
xbgth@yandex.ru

Белок-белковые взаимодействия лежат в основе практически каждого процесса, связанного с функционированием живой клетки. Молекулярное моделирование процесса взаимодействия белков необходимо для понимания их функционирования. В броуновской динамике белки рассматриваются как твердые тела, совершающие броуновское движение под действием электростатических и случайных сил. Данное приближение хорошо описывает взаимодействие белков в объеме, пока не происходит контакта белков их поверхностями. Для моделирования тесного контакта молекул используется метод молекулярной динамики. Эти методы в совокупности обеспечивают возможность полной реконструкции белок-белкового взаимодействия.

Нами были проведены серии вычислительных экспериментов с использованием метода броуновской динамики с целью исследования диффузионно-столкновительных комплексов двух пар электрон-транспортных белков: ферредоксина с гидрогеназой из *Chlamydomonas reinhardtii* и ферредоксин-НАДФ+ редуктазой (ФНР) из *Zea mays*. Для ферредоксина из *Chlamydomonas reinhardtii* и ФНР из *Zea mays* образование структур с энергией электростатического притяжения 6 кТ или выше происходит очень часто ( $k_{on}$  превышает  $2,8 \cdot 10^9 \text{ M}^{-1} \text{ c}^{-1}$ ). Были обнаружены три различные группы ориентаций ферредоксина. Большинство структур (96%) составляют одну однородно плотную группу (кластер), в которой ферредоксин расположен вблизи ФАДа ФНР, но его Fe-S кластер не обращён в сторону контактной области. Тем не менее расстояние между кофакторами довольно невелико (18,5 Å). Для гидрогеназы и ферредоксина из *Chlamydomonas reinhardtii* с энергией притяжения 6кТ или более образование комплексов происходит в 5 раз реже ( $k_{on}$  превышает  $6 \cdot 10^8 \text{ M}^{-1} \text{ c}^{-1}$ ). Были обнаружены четыре различные группы ориентаций ферредоксина. В каждой из них ферредоксин контактирует с одной и той же областью гидрогеназы, но расстояние между кофакторами белков весьма отличаются (17,7 - 25,5 Å). Мы предполагаем, что процесс образования функционально-активного комплекса для этих двух белков включает в себя по меньшей мере два этапа: первый - диффузионный захват одного белка другим, а второй - взаимная ориентация молекул в переходном комплексе.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа поддержана грантом РФФИ № 17-04-00676.